



TITLE:

界面の時間発展に対する微視的アプローチ (差異・パターン形成と拡散方程式の現在) (離散力学系の分子細胞生物学への応用数理)

AUTHOR(S):

西川, 貴雄; 堀部, 直人

---

CITATION:

西川, 貴雄 ...[et al]. 界面の時間発展に対する微視的アプローチ (差異・パターン形成と拡散方程式の現在) (離散力学系の分子細胞生物学への応用数理). 数理解析研究所講究録 2010, 1698: 29-36

ISSUE DATE:

2010-07

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/141707>

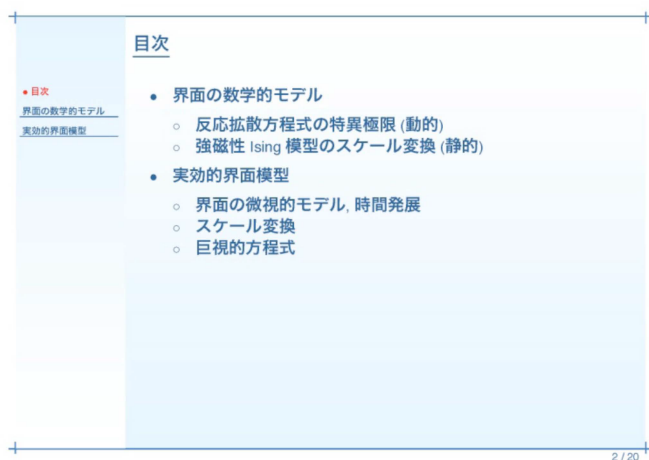
RIGHT:



強磁性のイジング模型(ミクロ)のスケール変換の話をして、次に反応拡散方程式(マクロ)の特異極限として界面が出てくるといいう 1980 年代に得られた結果を話す。その後、Spohn による実効的界面模型とその時間発展、スケール変換とその帰結としての巨視的方程式を紹介する。

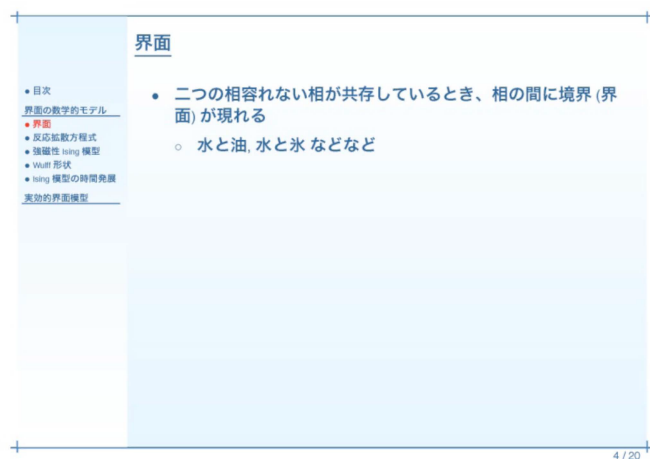
### 講師紹介

西川貴雄 (日本大学理工学部 専任講師)  
2001 年 東京大学数理科学研究科 数理科学専攻  
修了  
数理科学 博士



### 発表の概要

「界面の時間発展に対する微視的アプローチ」というタイトルで、数学サイドから話をする。確率論では流体力学極限(fluid-dynamic limit)とよばれる分野の結果の紹介となる。流体力学極限というのは、分子の平均自由行程  $l$  と、考えている系の特徴的な長さ  $L$  の比であるクヌーセン数(Knudsen number)を  $0$  へ近づけた極限のことである( $Kn=l/L \rightarrow 0$ )。



### 界面とは

相容れない二つの相が共存しているときに現れる境界を界面という。一方の相が気体、あるいは真空のとき、界面のことを表面とよぶことがある。理想気体であれば二つの相が完全に混合され界面は生じない。しかし、分子間相互作用が存在し、異種分子間の相互作用に比べ同種分子間の相互作



用の方がはるかに強い場合、それぞれが相分離した方が有利となる。相分離した二つの相の境界が界面である。

界面近傍の分子は、分離相内部の分子より自由エネルギーが高い。この差を界面自由エネルギー(interfacial free energy)という。界面には、界面自由エネルギーの総和を小さくするために界面の面積を小さくしようとする力が働く。この力が界面張力(interface tension)である。(表面に働く場合は表面張力(surface tension)である。)

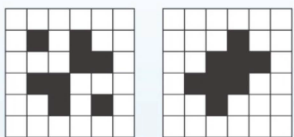
**強磁性 Ising 模型**

- 目次
- 界面の数学的モデル
- 反応拡散方程式
- 強磁性 Ising 模型
- Wulff 形状
- Ising 模型の時間発展
- 実効的界面模型

強磁性 Ising 模型

$$H_\beta(\sigma) = -\beta \sum_{x,y;|x-y|=1} \sigma(x)\sigma(y), \quad \sigma \in \{-1, +1\}^{[-N,N]^d \cap \mathbb{Z}^d}$$

$$\text{Prob}(\sigma = \sigma_0) = Z_{N,\beta}^{-1} \exp(-H_\beta(\sigma_0))$$



### 強磁性 Ising 模型

$\pm 1$  をとるスピンの配置を考える。同符号のスピンの隣り合うとエネルギーは  $\beta (=1/kT)$  だけ減少し、異符号だと  $\beta$  だけ上昇する。このときハミルトニアンは以下のように与えられる。

・ハミルトニアン：

$$H_\beta(\sigma) = -\beta \sum_{x,y;|x-y|=1} \sigma(x)\sigma(y)$$

ボルツマン分布を仮定することで、ある配置の実現確率を以下の式で与えることができる。

・配置  $\sigma_0$  の実現確率

$$P(\sigma = \sigma_0) = Z_{N,\beta}^{-1} e^{-H_\beta(\sigma_0)}$$

相分離のモデルとして強磁性 Ising 模型を考えたとき、 $\beta$  を上げていくとある閾値を超えたときに相が分かれるという相転移の存在が知られている。

**Wulff 形状**

- 目次
- 界面の数学的モデル
- 反応拡散方程式
- 強磁性 Ising 模型
- Wulff 形状
- Ising 模型の時間発展
- 実効的界面模型

Ising model の低温相 ( $\beta \gg 1$ ) において、 $+$ ,  $-$  スピンの比を一定に保つよう条件を課したとき、スケール変換の極限として Wulff 形状が現れる (Dobrushin-Kotecký-Schlosmann 1985)

「表面張力」 $\tau_\beta$  に対して、「総表面張力」と呼ばれる汎関数

$$\int_{\partial D} \tau_\beta(\vec{n}_s) ds$$

の  $\text{vol}(D) = c$  の条件下における変分問題の解 (静的)

### 強磁性 Ising 模型と界面(Wulff 形状)

強磁性 Ising 模型の低温相 ( $\beta = 1/kT \gg 1$ ) においてスピンの比を一定に保ち、スケール変換極限をとることで界面自由エネルギーを最小化させる境界の外形である Wulff 形状(ウルフ図形、ウルフ多面体図)が得られる。

これは数学的には、表面張力  $\tau_\beta$  に対して総表面張力とよばれる汎関数の体積一定 ( $\text{vol}(D)=c$ ) という条件下における変分問題の解である。

・総表面張力：

$$\int_{\partial D} \tau_\beta(\vec{n}_s) ds$$

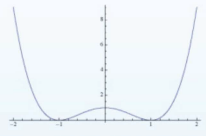
相分離が起きる程度の温度であれば上述のことが成立することが示されている。

**反応拡散方程式**

- 目次
- 界面の数学的モデル
- 反応拡散方程式
- 強磁性 Ising 模型
- Wulff 形状
- Ising 模型の時間発展
- 実効的界面模型

反応拡散方程式

$$\frac{\partial u_\epsilon}{\partial t} = \Delta u_\epsilon + \epsilon^{-1} F'(u_\epsilon)$$

$$F(r) = (r^2 - 1)^2$$


$\epsilon \rightarrow 0$  の極限として、平均曲率流の方程式が導出される (Evans-Souganidis 1992)

## 反応拡散方程式(マクロ)と界面

反応拡散方程式で反応項に二重井戸型のポテンシャルを与え、特異極限をとると平均曲率流の方程式(総表面張力のグラディエントフロー)が導出される。平均曲率流というのは、滑らかな超曲面が法線方向に各点での平均曲率に比例する速度で時間とともに運動していくときのその超曲面の族である。直感的には、いずれかのポテンシャルの底の値をとりながら空間方向の勾配を減らすことと考えることができ、その結果界面のダイナミクスが得られるのである。

- 目次
- 界面の数学的モデル
- 実効的界面モデル
- モデルの簡略化
- 微視的界面のモデル
- 微視的界面のエネルギー
- 保存量を持たない時間発展 (1)
- 保存量を持たない時間発展 (2)
- 保存量を持つ時間発展 (1)
- 保存量を持つ時間発展 (2)
- 巨視的な時間発展 (スケール変換)
- 流体力学極限 (大数の法則)
- 方程式の意味
- 証明の方法

### Ising 模型の時間発展

**問題:** Ising 模型に対応する時間発展 (Glauber dynamics, Kawasaki dynamics) について、時空スケール変換によって巨視的界面の時間発展は見えないか?

時間発展については、解析が非常に困難

- 低温相の系は非常にデリケート  
非常に sensitive で、状況によって系の様子が様変わりする  
時間発展で移り変わっていくところを捕まえないといけない

相分離がおきている状態を理想化したモデルを考えて、界面現象の時間発展について考察をする ⇒ 実効的界面モデル

## 考えたい問題と実効的界面モデル

Ising 模型(ミクロ)の時間発展はグラウバー力学 (Glauber dynamics) や 川崎力学 (Kawasaki dynamics) として記述できる。時空スケール変換によって界面(マクロ)の時間発展を記述することはできないだろうか。

ただし低温相の系は非常にデリケートであり解析が困難であることが知られている。つまり、確率論の立場から時間発展を追うことに強い興味があるものの、実際に追うことには成功していない。そこで、相分離が起きている状態を理想化したモデルへと系を単純化して考察したい。実効的界面モデルはそのようなモデルである。

- 目次
- 界面の数学的モデル
- 実効的界面モデル
- モデルの簡略化
- 微視的界面のモデル
- 微視的界面のエネルギー
- 保存量を持たない時間発展 (1)
- 保存量を持たない時間発展 (2)
- 保存量を持つ時間発展 (1)
- 保存量を持つ時間発展 (2)
- 巨視的な時間発展 (スケール変換)
- 流体力学極限 (大数の法則)
- 方程式の意味
- 証明の方法

### 実効的界面モデル

- 目次
- 界面の数学的モデル
- 実効的界面モデル
- モデルの簡略化
- 微視的界面のモデル
- 微視的界面のエネルギー
- 保存量を持たない時間発展 (1)
- 保存量を持たない時間発展 (2)
- 保存量を持つ時間発展 (1)
- 保存量を持つ時間発展 (2)
- 巨視的な時間発展 (スケール変換)
- 流体力学極限 (大数の法則)
- 方程式の意味
- 証明の方法

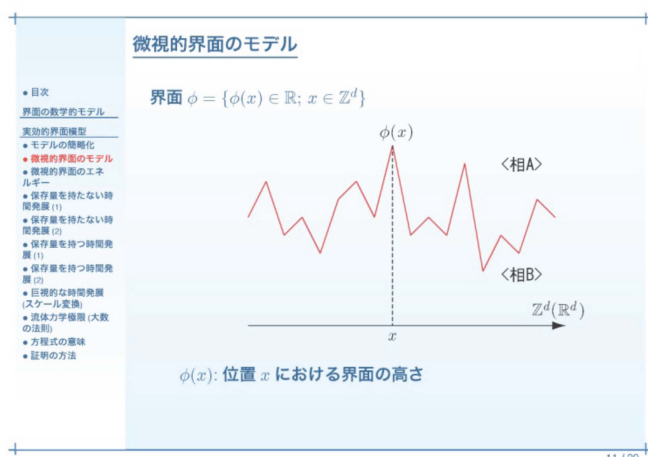
### モデルの簡略化

界面を一部分切り出すと、graph になっているとみなす

× overhang  
× bubble (これらの出現確率は小さいはずで、無視してしまう)

## 実効的界面モデル

界面を一部切り出すとグラフになっているとみなすことができる。低温相を考えているので、オーバーハングやバブルの出現率は小さいはずであり、考慮しない。



### 微視的界面の記述

まずは微視的界面がどのように記述できるかを考える。界面がグラフになっていると見なすことができるため、 $\phi(x)$ で位置  $x$  における界面の高さを表すこととする。 $\phi$  の上側が相 A、下側が相 B と相分離している。

・界面：

$$\phi = \{\phi(x) \in \mathbb{R}; x \in \mathbb{Z}^d\}$$

してみる。するとボックスの上端は界面が変化しても必ず存在するため、隣接するボックスの高さの差を考えればよいとわかる。グラフでは隣接する座標での  $\phi$  の値の差を考えることに対応する。実数から実数への写像  $V$ (絶対値をとりたいが、後の証明のため  $\mathbf{C}^2$ 、対称、狭義凸を仮定)を用いて以下のようにエネルギーを与える。

・ハミルトニアン：

$$H(\phi) = \frac{1}{2} \sum_{x,y \in \mathbb{Z}^d, |x-y|=1} V(\phi(x) - \phi(y))$$

**保存量を持たない時間発展 (1)**

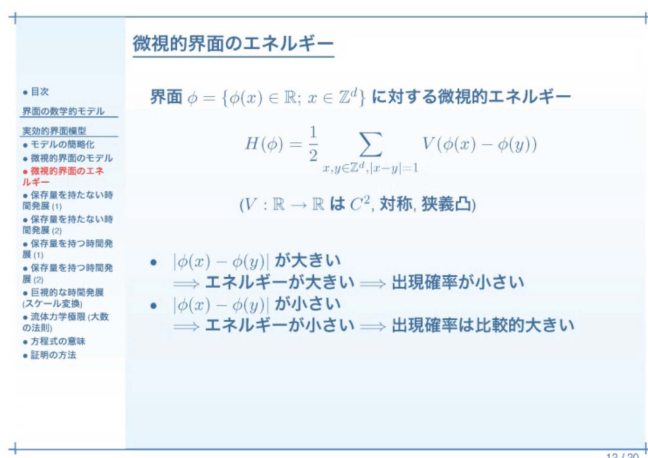
Langevin eq.

$$d\phi_t^0(x) = -\frac{\partial H}{\partial \phi(x)}(\phi_t^0)dt + \sqrt{2}dw_t(x), \quad x \in \Gamma_N \quad (1)$$

- $\Gamma_N = (\mathbb{Z}/N\mathbb{Z})^d$  (周期境界条件で考える)
- $w = \{w_t(x); x \in \Gamma_N\}$ : 独立な Brown 運動の族
- $\frac{\partial H}{\partial \phi(x)} = \sum_{y: |x-y|=1} V'(\phi(x) - \phi(y))$

$\longleftrightarrow$  Glauber dynamics

13 / 20



### 微視的界面のエネルギー

次にエネルギーをどのように与えるかを考える。ボックスを積み上げていくことでグラフを離散化

### 保存量を持たない時間発展 (1)

モデルの簡略化が完了したので、ダイナミクスを考えていく。熱によるゆらぎを考慮した ランジュバン方程式が妥当だろう。

・ランジュバン方程式：

$$d\phi_t^0(x) = -\frac{\partial H}{\partial \phi(x)}(\phi_t^0)dt + \sqrt{2}dw_t(x)$$

第一項がエネルギーのグラディエントフロー、第二項が熱ゆらぎである。周期境界条件、ならびに  $w$  として独立なブラウン運動の族を与えることで、保存量を持たないダイナミクスという意味でグラウバー力学に相当するものができる。

**保存量を持たない時間発展 (2)**

時間発展 (1) は microscopic domain  $D_N$  上の Dirichlet 型境界条件の下で考えることもできる

- $D \subset \mathbb{R}^d$  (境界は十分なめらか)
- $D_N = N D \cap \mathbb{Z}^d$
- 境界条件は

$$\phi_t(x) = N^{d+1} \int_{B(x/N, 1/N)} f(\theta) d\theta, \quad x \in \mathbb{Z}^d \setminus D_N, t \geq 0$$

で与える。ただし、 $f: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$  は十分滑らかな関数とする

14 / 20

### 保存量を持たない時間発展 (2)

ディリクレ型境界条件下で考えることもできる。その際は、境界は十分に滑らかであると仮定した上で以下のように境界条件を与える。(ここでは紹介のみ。)

- ディリクレ型境界条件:

$$\phi_t(x) = N^{d+1} \int_{B(x/N, 1/N)} f(\theta) d\theta$$

**保存量を持つ時間発展 (2)**

Remark 1. 伊藤の公式により、以下がすぐわかる:

$$\sum_{x \in \Gamma_N} \phi_t(x) \equiv \sum_{x \in \Gamma_N} \phi_0(x) (= \text{const.}), \quad t \geq 0, \quad (3)$$

つまり、高さ変数の総和 (= 粒子数) は時間発展により保存される

実際、(3) を満たす  $\phi$  全体のなす affine space 上の Langevin 方程式が (2) そのもの

$\Longleftrightarrow$  Kawasaki dynamics

16 / 20

### 保存量を持つ 時間発展

現実的な仮定として、実効的界面模型に体積保存を導入したい。そのため、アファイン空間上の確率微分方程式を考える。つまり、アファイン空間上で体積を保存するようなメトリックを導入するのである。例えば、熱ゆらぎとラプラシアンを以下のように定める。

- 熱ゆらぎ:

$$E[\tilde{w}_s(x) \tilde{w}_t(y)] = -\Delta(x, y) s \wedge t$$

- ラプラシアン:

$$\Delta f(x) = \sum_{y \in \Gamma_N, |x-y|=1} (f(y) - f(x))$$

**保存量を持つ時間発展 (1)**

$$d\phi_t(x) = \Delta \left\{ \frac{\partial H}{\partial \phi(\cdot)}(\phi_t) \right\} (x) dt + \sqrt{2} d\tilde{w}_t(x), \quad x \in \Gamma_N \quad (2)$$

- $\tilde{w} = \{\tilde{w}_t(x); x \in \Gamma_N\}$ : 以下の共分散で定まるガウス過程:
 
$$E[\tilde{w}_s(x) \tilde{w}_t(y)] = -\Delta(x, y) s \wedge t$$
- $\Delta = \Delta_{\Gamma_N}: \Gamma_N$  上の (離散的) ラプラシアン
 
$$\Delta f(x) = \sum_{y \in \Gamma_N, |x-y|=1} (f(y) - f(x)), \quad x \in \Gamma_N$$

15 / 20

伊藤の公式から高さ変数の総和が保存される (= 体積の保存) ことを確認できる。こちらは川崎力学を導入したことになる。

- 体積保存の確認:

$$\sum_{x \in \Gamma_N} \phi_t(x) \equiv \sum_{x \in \Gamma_N} \phi_0(x) = \text{const}$$



## 巨視的な時間発展 (スケール変換)

- 目次
- 界面の数学的モデル
- 基底の界面模型
- モデルの階層化
- 微視的界面のモデル
- 微視的界面のエネルギ
- 保存量を持たない時間発展 (1)
- 保存量を持つ時間発展 (2)
- 保存量を持つ時間発展 (1)
- 保存量を持つ時間発展 (2)
- 巨視的な時間発展 (スケール変換)
- 流体力学極限 (大数の法則)
- 方程式の意味
- 証明の方法

## 1. 保存量を持たない時間発展

$$h^{N,0}(t, \theta) \ (t \in [0, t], \theta \in [0, 1]^d =: \mathbb{T}^d)$$

$$h^{N,0}(t, x/N) = N^{-1} \phi_{N^2 t}^0(x), \quad x \in \Gamma_N$$

( $N^{-1}$  in space,  $N^2$  in time)

## 2. 保存量を持つ時間発展

$$h^N(t, \theta) \ (t \in [0, t], \theta \in \mathbb{T}^d)$$

$$h^N(t, x/N) = N^{-1} \phi_{N^4 t}(x), \quad x \in \Gamma_N$$

( $N^{-1}$  in space,  $N^4$  in time)

この order は、系が平衡状態に近づくスピードによって決まる (generator の spectral gap, logarithmic Sobolev ineq.)

17 / 20

## 流体力学極限 (大数の法則)

- 目次
- 界面の数学的モデル
- 基底の界面模型
- モデルの階層化
- 微視的界面のモデル
- 微視的界面のエネルギ
- 保存量を持たない時間発展 (1)
- 保存量を持つ時間発展 (2)
- 保存量を持つ時間発展 (1)
- 保存量を持つ時間発展 (2)
- 巨視的な時間発展 (スケール変換)
- 流体力学極限 (大数の法則)
- 方程式の意味
- 証明の方法

## 1. 保存量を持たない時間発展 ([Funaki-Spohn 97], [N. 03])

$$h^{N,0} \longrightarrow h^0 : \frac{\partial h^0}{\partial t} = \operatorname{div} \nabla \sigma(\nabla h^0),$$

$\sigma : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$  : 表面張力 (熱力学極限により定まる)

## 2. 保存量を持つ時間発展 ([N. 02])

$$h^N \longrightarrow h : \frac{\partial h}{\partial t} = -\Delta \operatorname{div} \nabla \sigma(\nabla h)$$

18 / 20

## 巨視的な時間発展 (スケール変換)

先ほど紹介した「保存量を持たない時間発展」、「保存量をもつ時間発展」はミクロな過程であると考えている。あれらをスケール変換することでマクロな時間発展を追えるのではないだろうか。

まず空間をシュリンクし、時間をスピードアップする。空間方向はどちらのダイナミクスも  $N^{-1}$  倍するが、時間は保存量を持たないダイナミクスで  $N^2$  倍、持つダイナミクスで  $N^4$  倍する(これらオーダーは数学的には generator の spectral gap あるいは logarithmic Sobolev ineq. からでてくる。ここでは Bakry-Emery criteria を用いて計算した。)。これによりミクロな世界からマクロな世界に移ることができた。あとは極限をとってなにが得られたのかを考えればよい。

- 保存量を持たない時間発展のスケール変換

$$h^{N,0}(t, x/N) = N^{-1} \phi_{N^2 t}^0(x)$$

- 保存量を持つ時間発展のスケール変換

$$h^N(t, x/N) = N^{-1} \phi_{N^4 t}(x)$$

## 流体力学極限 (大数の法則)

ここではスケール変換を行い、極限をとった結果を紹介する。保存量を持たない時間発展の、周期境界条件における結果は Funaki-Spohn のものが、ディリクレ条件下ならびに保存量をもつ時間発展については西川の結果がある。

- 保存量を持たない時間発展 (周期境界条件):

$$\frac{\partial h^0}{\partial t} = \operatorname{div} \nabla \sigma(\nabla h^0)$$

- 保存量をもつ時間発展:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -\Delta \operatorname{div} \nabla \sigma(\nabla h)$$

**方程式の意味**

それぞれの方程式は、考える関数空間は異なるが、ともに「総表面張力」

$$\Sigma(h) = \int \sigma(\nabla h(\theta)) d\theta$$

の gradient flow になっている

19 / 20

• 以下の値が非負であることを示せばよい。

$$\frac{d}{dt} E[||h^N(t) - h(t)||^2]$$

1. 確率過程、偏微分方程式に対する energy estimate を行う。
2. 局所エルゴード定理を証明するために平衡状態の特徴付けを行う。
3. 時空平均の項が出てくるのでその極限の特徴付けを行う。

以上により最終的な結果を得る。

### 得られた方程式の意味

先ほど得られた式はどちらも、総表面張力とよばれる量のグラディエントフロー(=界面のダイナミクス)になっている。つまり、表面張力によって巨視的なダイナミクスが存在するという描像を実効的界面モデルのモデルによって説明することができたということになる。

### 質疑応答

**Q.** 巨視的な時間発展をみるためのスケール変換に関して。スケールは数学的要請により決まるのか、それとも界面のダイナミクスという現象を見るためにあるスケールを選択したのか？

**A.** 適切なスケールは系の数学的な特徴から決まっている。

**Q.** 表面張力  $\sigma$  は具体的にどのような形で書き下せるか？

**A.** きれいな形で書き下すことはできない。非線形の式の積分となってしまう、式や値の具体的な計算は難しい。

**Q.** ラフな(=滑らかではない)界面は出てくるか？

**A.** 境界条件が曲がっていればフラットではない界面が現れるが、滑らかさを持った界面が現れる。

**証明の方法**

証明としては、

$$\frac{d}{dt} E[||h^N(t) - h(t)||^2]$$

を計算し、極限をとったとき、nonnegativeであることを示すことになる  
(正確には、巨視的な偏微分方程式も離散化し、それと比べる)

その際、確率過程の法則に対する時空平均の項が出てくるので、

- 確率過程、偏微分方程式に対する energy estimate
- 平衡状態の特徴付け (stationary measures, Gibbs measures)
- 時空平均の極限の特徴付け (平衡状態の mixture でかける)

を経て最終的な結果を得る。

20 / 20

### 証明の方法

先ほど得られた式が総表面張力とよばれる量のグラディエントフローになっていることの証明を方針だけ示す。

**Q.** もともとの強磁性 Ising モデルにおける界面の運動は扱うのが難しい？

**A.** 非常に難しい。誰かが計算できたという話も聞いたことがない。オーバーハングやバブルの問題が非常に大きい。

**Q.** 数値計算では駄目なのか？なぜわざわざ数学的に厳密に考えるのか？

**A.** 数学的興味として方程式を完全な形で書き表したいという欲求がある。物理の人が仮定する「局所エルゴード定理が成立する」という条件を含め、きちんと数学的に厳密に詰めていきたい。

**Q.** では現象を説明する方法としては数値計算と数学的に厳密に考察するのではどちらが「優れて」いるのか？

**A.** 現象を追うのであれば数値計算でも ある程度は追えるのではないかと思われる。ただし、それではメカニズムまでは把握できない。メカニズムまで分かろうとするならば、数学として厳密に導出する方がよいのではないか。

(付記：数値計算によれば、モデルが設定できれば結果を導くことが出来るという意味で極めて有用である。ただし、その結果の妥当性の検証、結果の精度を上げることには困難が伴う。数値計算による予測に従い厳密な議論を出来る限り進め、再び数値計算へフィードバックする、というプロセスは、双方にとって有益であると思われる。)

**Q.** ミクロスケールで見たときとマクロスケールで見たとき、ミクロスケールにはなくてマクロスケールで新しく入ってくる要素は何かあるか？

**A.** 自然現象は変分問題に帰着できる、と信じている。この信念をチェックできれば嬉しい。

**Q.** 生物だと、発生の過程でポテンシャルが一定ではないことを想定する。強磁性 Ising 模型ではポテンシャル一定だが、ポテンシャルを変化させるという方向へモデルを拡張していくことはあり得るか？

**A.** そのような研究結果がすでにあるという話は聞かない。現実には即した適切なモデルが設定できるのであれば、やってみたいという思いはある。ただし、ポテンシャルの変動とスケールとの関係など、数学的には容易ではないと思われる。

ノート担当：堀部直人(東京大学大学院)